Известия НАН Армении, Физика, т.60, №1, с.71–78 (2025) УДК 533.9 DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.1-71

ТЕРМОДИНАМИКА НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В СИЛЬНО СПЛЮСНУТОЙ АСИММЕТРИЧНОЙ ЭЛЛИПСОИДАЛЬНОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ InAs

А.А. НААПЕТЯН^{*}

Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

*e-mail: n.aram2097@gmail.com

(Поступила в редакцию 26 февраля 2025 г.)

Исследованы термодинамические характеристики невзаимодействующего электронного газа в сильно сплюснутой эллипсоидальной асимметричной квантовой точке InAs. Получены формулы для энергетического спектра и функции распределения системы в больцмановском приближении. Представлены аналитические выражения для средней энергии, энтропии и теплоемкости системы. Изучены зависимости перечисленных термодинамических характеристик от температуры и геометрических параметров квантовой точки.

1. Введение

Термодинамические характеристики электронного и дырочного газов, локализованных в квантовой точке (КТ) различных форм и размеров, могут гибко управляться путем изменения геометрических параметров изучаемых структур [1-4]. При этом полностью квантованный спектр носителей заряда приводит к специфическому поведению таких параметров, как энтропия и теплоёмкость газа в зависимости от геометрических размеров КТ [5, 6]. В работе [5] рассматривалось поведение парно-взаимодействующего дырочного газа, локализованного в двояковыпуклой тонкой квантовой линзе с круговым сечением. Было показано, что благодаря аксиальной асимметрии квантовой линзы в такой системе при изменении толщины линзы может реализоваться фазовый переход первого рода.

С другой стороны, передача тепла электронному или дырочному газам, находящимся в КТ, существенным образом зависит от межуровневых расстояний изучаемой системы, т.к. поглощение или же рассеяние передаваемого количества энергии во многом обусловлены характером энергетических уровней рассматриваемого газа.

Ясно, что простейшим приближением, описывающим *N*-частичную систему, локализованную в КТ той или иной геометрии, является модель идеального газа, электронов или же дырок. В этом случае можно воспользоваться одночастичным приближением для описания энергетической структуры *N*-частичного газа. Для сравнительно простых геометрических моделей КТ вычисления статистических сумм, описывающих поведение газа невзаимодействующих частиц, может быть

реализовано аналитически точно [7, 8]. Однако современные методы получения КТ позволяют реализовывать структуры со сложной геометрией, которые характеризуются большим количеством геометрических параметров. Меняя эти параметры, можно гибко управлять спектральными, а следовательно, и термодинамическими характеристиками носителей заряда, содержащихся в них. Ясно, что для КТ со сложной геометрией даже одночастичная задача определения спектра энергии является сложной и обычно решается либо в рамках приближенных квантовомеханических методов, либо на основе численного моделирования [9, 10].

Яркими примерами КТ со сложной геометрией являются сильно сплюснутые и сильно вытянутые эллипсоидальные КТ, поведение частиц в которых можно удачно описать в рамках адиабатического приближения [11]. Традиционно обсуждаются модели эллипсоидальных и линзообразных КТ с круглым сечением [12, 13]. Вместе с тем, могут реализовываться эллипсоидальные КТ как вытянутой, так и сплюснутой геометрий, полуоси которых не равны друг другу. В связи с этим вызывает интерес изучение физических характеристик подобных систем, что позволит дать детальную картину энергетического спектра указанных систем.

В работе исследуются термодинамические характеристики невзаимодействующего электронного газа, локализованного в сильно сплюснутой эллипсоидальной КТ с не равными друг другу полуосями *a*, *b*, и *c*, удовлетворяющими следующим неравенствам: $a \neq b \neq c$ и $a \gg c$, $b \gg c$.

2. Теория

Рассмотрим невзаимодействующий электронный газ, состоящий из *N* частиц в асимметричной эллипсоидальной сильно сплюснутой квантовой точке (АЭСКТ). Схематически систему можно представить в следующем виде (рис.1).

Гамильтониан системы дается следующим соотношением:



Рис.1. Схематическое изображение АЭСКТ с электронным газом: *a*, *b* и *c* – полуоси в направлениях *OX*, *OY* и *OZ*, соответственно.

где $\mu = 0.026m_0$ – эффективная масса электрона в InAs (m_0 есть масса свободного электрона). Для потенциала ограничения $V_{\text{conf}}(x_i, y_i, z_i)$ имеем:

$$V_{\text{conf}}(x_i, y_i, z_i) = \begin{cases} 0, e^- \in A \Im C K T, \\ \infty, e^- \notin A \Im C K T. \end{cases}$$
(2)

Сильное размерное квантование в аксиальном направлении *OZ* позволяет решать задачу в рамках адиабатического приближения, в котором поведение частиц можно рассматривать в двух перпендикулярных направлениях: вдоль оси *OZ* и в плоскости *XOY*. Движение электрона вдоль оси *OZ* принимаем за быструю подсистему, а движение в плоскости *XOY* – за медленную.

В силу вышесказанного, волновая функция системы может быть представлена в виде произведения волновых функций по двум перпендикулярным направлениям [11]:

$$\Psi(\mathbf{r}_{1},...,\mathbf{r}_{N}) = \psi_{f}(z_{1};(x_{1},y_{1}),...,z_{N};(x_{N},y_{N}))\psi_{s}(x_{1},...,x_{N},y_{1},...,y_{N}), \qquad (3)$$

где $\psi_f(z_1;(x_1, y_1), ..., z_N;(x_N, y_N))$ есть волновая функция быстрой подсистемы, содержащая в качестве параметров координаты медленной (x, y), а $\psi_s(x_1, ..., x_N, y_1, ..., y_N)$ – волновая функция медленной подсистемы.

В направлении *OZ* необходимо решить задачу бесконечно глубокой потенциальной ямы с шириной $L(x_i, y_i)$, которая определяется приведенной ниже формулой:

$$L(x_i, y_i) = 2c\sqrt{1 - \frac{x_i^2}{a^2} - \frac{y_i^2}{b^2}}.$$
 (4)

Уравнение Шредингера быстрой подсистемы имеет вид:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2\mu} \sum_{i=1}^{N} \hat{P}_{zi}^{2} + \sum_{i=1}^{N} V_{\text{conf}}^{z}(z_{i};(x_{i},y_{i})) \end{bmatrix} \psi_{f}(z_{1};(x_{1},y_{1}),...,z_{N};(x_{N},y_{N}))$$

$$= E_{f} \psi_{f}(z_{1};(x_{1},y_{1}),...,z_{N};(x_{N},y_{N})).$$

$$(5)$$

Волновая функция и энергетический спектр системы невзаимодействующих частиц для одномерной задачи хорошо известны и определяются следующими выражениями [11]:

$$\psi_f(z_1;(x_1,y_1),...,z_N;(x_N,y_N)) = \prod_{i=1}^N \sqrt{\frac{2}{L(x_i,y_i)}} \sin\left(\frac{\pi n_{z_i}}{L(x_i,y_i)} z_i + \delta_{n_{z_i}}\right), \quad (6)$$

$$E_f \equiv E_{n_{z_1}, n_{z_2}, \dots, n_{z_N}} = \sum_{i=1}^N \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu L^2(x_i, y_i)} n_{z_i}^2.$$
(7)

Учитывая локализующее влияние стенок КТ на частицы, стремящееся направить их в сторону геометрического центра КТ, можно предположить, что они будут сконцентрированы в основном вокруг геометрического центра КТ, что приводит к выполнению условий $x_i \ll a$ и $y_i \ll b$ и позволяет разложить множитель $1/L^2(x_i, y_i)$ в выражении энергии $E_{n_{z1}, n_{z2}, ..., n_{zN}}$ в ряд Тейлора по малым параметрам x_i / a и y_i / b , после которого получается новое выражение для

 $1/L^2(x_i, y_i)$ следующего вида:

$$\frac{1}{L^2(x_i, y_i)} \approx \frac{1}{4c^2} \left(1 + \frac{x_i^2}{a^2} + \frac{y_i^2}{b^2} \right).$$
(8)

После подстановки (8) в выражение для E в уравнение (7), получаем

$$E_{n_{z_1}, n_{z_2}, \dots, n_{z_N}} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu c^2} n_{z_i}^2 + \frac{\mu \Omega_a^2(n_{z_i})}{2} x_i^2 + \frac{\mu \Omega_b^2(n_{z_i})}{2} y_i^2 \right), \tag{9}$$

где $\Omega_a(n_{zi}) = \frac{\pi \hbar}{2\mu ac} n_{zi}$ и $\Omega_b(n_{zi}) = \frac{\pi \hbar}{2\mu bc} n_{zi}$. Из-за сильной сплюснутости КТ в ак-

сиальном направлении мы считаем, что все частицы находятся в основном состоянии энергетического спектра $E_{n_{z1},n_{z2},...,n_{zN}}$, так что $n_{z1} = n_{z2} = \cdots = n_{zN} = 1$. С учетом этого факта и того, что полученная энергия играет роль эффективной потенциальной энергии в уравнении Шредингера для медленной подсистемы, после подстановки $E_{n_{z1},n_{z2},...,n_{zN}}$ в волновое уравнение получаем:

$$\left(\sum_{i=1}^{N} \left[\frac{\hat{P}_{xi}^{2}}{2\mu} + \frac{\mu\Omega_{a}^{2}(1)}{2}x_{i}^{2}\right] + \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{\hat{P}_{yi}^{2}}{2\mu} + \frac{\mu\Omega_{b}^{2}(1)}{2}y_{i}^{2}\right]\right) \psi_{s}(x_{1},...,x_{N},y_{1},...,y_{N}) \\
= \left(E - N\frac{\pi^{2}\hbar^{2}}{8\mu c^{2}}\right) \psi_{s}(x_{1},...,x_{N},y_{1},...,y_{N}) \equiv \mathcal{E}\psi_{s}(x_{1},...,x_{N},y_{1},...,y_{N}).$$
(10)

Из уравнения (10) следует, что двумерный гамильтониан системы может быть представлен в виде суммы гамильтонианов:

$$\hat{H}(x_1,...,x_N,y_1,...,y_N) = \hat{H}_1(x_1,...,x_N) + \hat{H}_2(y_1,...,y_N).$$
(11)

Таким образом, приходим к задаче двумерного асимметричного осциллятора в плоскости *XOY*. Решение этой проблемы известно, и *N*-частичный спектр будет иметь следующий вид [11]:

$$\mathcal{E}_{n_x,n_y} = \hbar \Omega_a(1) \sum_{i=1}^N \left(n_{xi} + \frac{1}{2} \right) + \hbar \Omega_b(1) \sum_{i=1}^N \left(n_{yi} + \frac{1}{2} \right), \tag{12}$$

где $n_{xi(yi)} = 0, 1, 2, ...$ квантовое число, характеризующее состояния частиц вдоль оси OX(OY).

Для изучения термодинамических характеристик данной системы в больцмановском приближении следует вычислить следующую статистическую сумму [2]:

$$Z(N) = \frac{1}{N!} \sum_{n_x, n_y} e^{-\beta E_{n_{xi}, n_{yi}}},$$
(13)

где $\beta = 1 / k_B T$. После подстановки выражении энергии $E_{n_{xi}, n_{yi}, n_{zi}}$ в Z(N) находим

$$Z(N) = \frac{1}{N!} \times \exp\left(-\beta \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu c^2} N\right) \times \left\{\sum_{n_x} \exp\left(-\beta \hbar \Omega_a(1) \sum_{i=1}^N \left(n_{xi} + \frac{1}{2}\right)\right)\right\}$$

$$\times \left\{\sum_{n_y} \exp\left(-\beta \hbar \Omega_b(1) \sum_{i=1}^N \left(n_{yi} + \frac{1}{2}\right)\right)\right\}.$$
(14)

Поскольку система состоит из N тождественных частиц, то сумма внутри экспоненты дает произведение числа частиц N с выражением в скобке. Учитывая это, можем написать:

$$Z(N) = \frac{1}{N!} \times \exp\left(-\beta \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu c^2} N\right) \times \left[\sum_{n_x} \exp\left(-\beta \hbar \Omega_a(1) \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\right)\right]^N \times \left[\sum_{n_y} \exp\left(-\beta \hbar \Omega_b(1) \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\right)\right]^N.$$
(15)

Выражения под знаками сумм являются бесконечно убывающими геометрическими прогрессиями, что позволяет вычислить эти суммы аналитически. В результате для Z(N) получим:

$$Z(N) = \frac{1}{4^{N} N!} \times \exp\left(\frac{-\beta \pi^{2} \hbar^{2} N}{8 \mu c^{2}}\right) \times \left[\operatorname{csch}\left\{\frac{\beta \hbar \Omega_{a}}{2}\right\} \times \operatorname{csch}\left\{\frac{\beta \hbar \Omega_{b}}{2}\right\}\right]^{N}.$$
 (16)

На основе выражения (16) можно вычислить термодинамические характеристики изучаемого газа – среднюю энергию $\langle E \rangle$, энтропию *S*, а также теплоёмкость C_V :

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \qquad S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \qquad C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}.$$
 (17)

После вычислений для вышеуказанных параметров получаются следующие аналитические соотношения:

$$\langle E \rangle = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu c^2} N + \frac{N\hbar}{2} \left[\Omega_a \coth\left(\frac{\beta\hbar\Omega_a}{2}\right) + \Omega_b \coth\left(\frac{\beta\hbar\Omega_b}{2}\right) \right], \tag{18}$$

$$S = kN \ln \left[\left(\frac{4\sqrt[N]}{4\sqrt[N]} \operatorname{csch} \left\{ \frac{1}{2} \right\} \times \operatorname{csch} \left\{ \frac{1}{2} \right\} \right]$$

$$(19)$$

$$-\frac{\beta\hbar}{2} \left(\Omega_{a} \operatorname{coth} \left[\frac{\beta\hbar\Omega_{a}}{2} \right] + \Omega_{b} \operatorname{coth} \left[\frac{\beta\hbar\Omega_{b}}{2} \right] \right) \right],$$

$$C_{V} = Nk \left(\frac{\beta\hbar}{2} \right)^{2} \left[\Omega_{a}^{2} \operatorname{csch}^{2} \left(\frac{\beta\hbar\Omega_{a}}{2} \right) + \Omega_{b}^{2} \operatorname{csch}^{2} \left(\frac{\beta\hbar\Omega_{b}}{2} \right) \right].$$
(20)

3. Обсуждение результатов

Полученные выражения (18)–(20) позволяют детально изучить зависимости вышеприведенных термодинамических параметров от температуры и геометрических размеров изучаемой КТ при различных значениях числа частиц N. Расчеты будем проводить для КТ InAs, в котором $\mu = 0.026m_0 - эффективная масса электрона. Геометрические значения параметров <math>a,b$ и c для КТ в направлениях OX, OY и OZ равны $5a_B$, $7a_B$ и $1a_B$, соответственно. На рис.2а представлена зависимость средней энергии $\langle E \rangle$ от температуры газа T в интервале от 100 до



Рис.2. Зависимость средней энергии $\langle E \rangle$ от (а) температуры T и (b) от значений полуоси c в направлении OZ, при постоянной температуре T = 300K, и при фиксированных значениях полуосей $a = 5a_B$, $b = 7a_B$ в направлении OX и OY, соответственно, для случаев числа частиц в системе: I - N = 4, 2 - N = 6 и 3 - N = 8.

300 К. Значение $\langle E \rangle$ увеличивается с ростом температуры T. Это объясняется тем, что в случае невзаимодействующего электронного газа средняя энергия (внутренняя энергия) определяется только средней кинетической энергией движения частиц, которая, в свою очередь, зависит от температуры T и с её ростом увеличивается. При этом, как и следовало ожидать, рост числа частиц N в системе приводит к увеличению средней энергии всей системы, что является следствием прямой пропорциональности средней кинетической энергии системы числу частиц N.

На рис.2b показана зависимость средней энергии от полуоси c в пределах изменения от $0.6a_B$ до $2a_B$. Увеличение размера КТ в аксиальном направлении приводит к ослаблению размерного квантования и уменьшению аксиальной энергии, результатом чего является уменьшение значений средней энергии системы.

Рис.3а, в представляют зависимости энтропии системы S от температуры T при постоянных геометрических параметрах КТ, а также от полуоси c при постоянной температуре T = 300 К. Как показано на рис.3а, с увеличением температуры энтропия растет, что является следствием повышения степени



Рис.3. Зависимость энтропии системы S от (а) температуры T и (b) от значений полуоси c в направлении OZ при постоянной температуре T = 300К и при фиксированных значениях полуосей $a = 5a_B$, $b = 7a_B$ в направлении OX и OY, соответственно, для случаев числа частиц в системе: 1 - N = 4, 2 - N = 6 и 3 - N = 8.

неупорядоченности в системе, причем увеличение числа частиц также приводит к росту хаоса в системе. Увеличение размера КТ (рис.3b) в направлении *OZ* приводит к сближению энергетических уровней (из-за ослабления размерного квантования), вследствие чего вероятность переходов частиц между разными уровнями растёт, тем самым увеличивая энтропию системы.

На рис.4а, b показаны зависимости теплоёмкости системы C_V от температуры T и полуоси a KT. Из рис.4а видно, что изменение температуры не влияет на теплоёмкость. Это можно объяснить тем, что в случае идеального газа теплоёмкость системы не зависит от температуры, так как определяется соотношением $C_V = \partial \langle E \rangle / \partial T$. Ввиду того, что зависимость $\langle E(T) \rangle$ близка к линейной, C_V практически не меняется. С другой стороны, C_V прямо пропорциональна числу частиц N и для её увеличения на единицу температуры нужно больше энергии. Этим и объясняется увеличение значения C_V с ростом числа частиц. Рис.4b показывает, что на увеличение геометрического размера КТ в направлении оси OXтеплоёмкость системы также реагирует слабо.



Рис.4. Зависимость теплоёмкости системы C_V от (а) температуры T и (b) от значения полуоси a в направлении OX при постоянной температуре T = 300К и при фиксированных значениях полуосей $b = 7a_B$, $c = 1a_B$, в направлении OY и OZ, соответственно, для случаев числа частиц в системе: 1 - N = 4, 2 - N = 6 и 3 - N = 8.

Средняя энергия и энтропия невзаимодействующего электронного газа с ростом температуры увеличиваются, в то время как теплоёмкость газа практически не меняется. С другой стороны, рост геометрических размеров КТ приводит к увеличению энтропии системы и к уменьшению средней энергии. При этом теплоёмкость газа, как и в первом случае, остается неизменной.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. L.F.C. Pereira, E.O. Silva. Quantum Reports, 6, 664 (2024).
- H.Ts. Ghaltaghchyan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan. Micro and Nanostructures, 174, 207471 (2023).
- 3. R. Khordad, B. Mirhosseini, M.M. Mirhosseini. J. Low Temp. Phys., 197, 95 (2019).
- 4. F.S. Nammas. Phys. A: Stat. Mech. Appl., 508, 187 (2018).
- 5. M.A. Mkrtchyan, Y.S. Mamasakhlisov, D.B. Hayrapetyan, S. Baskoutas, H.A. Sarkisyan.

Heliyon, 10, e34762 (2024).

- 6. A.A. Nahapetyan, M.A. Mkrtchyan, Y.Sh. Mamasakhlisov, M.Ya. Vinnichenko, D.A. Firsov, H.A. Sarkisyan. NIMA, 1073, 170251 (2025).
- 7. A.M. Babanli, M. Balci, V. Sabyrov, R. Saparguliyev, Sh. Shamuhammedov, A. Kakalyyev. J. Low Temp. Phys., 217, 584 (2024).
- 8. B. Boyacioglu, A. Chatterjee. Physica E, 44, 1826 (2012).
- 9. M. Grundmann, O. Stier, D. Bimberg. Phys. Rev. B, 52, 11969 (1995).
- 10. R. Khordad, H. Bahramiyan. Eur. Phys. J. Appl. Phys., 67, 20402 (2014).
- В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. Задачи по квантовой механике. Наука, Москва, 1992.
- D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan. Phys. E: Low-Dim. Syst. Nanostr., 75, 353 (2016).
- H.A. Sarkisyan, D.B. Hayrapetyan, L.S. Petrosyan, E.M. Kazaryan, A.N. Sofronov, R.M. Balagula, D.A. Firsov, L.E. Vorobjev, A.A. Tonkikh. Nanomaterials, 9, 56 (2019).

ՉՓՈԽԱԶԴՈՂ ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ԳԱԶԻ ՋԵՐՄԱԴԻՆԱՄԻԿԱՆ ՈՒԺԵՂ ՍԵՂՄՎԱԾ ԱՆՀԱՄԱՉԱՓ ԷԼԻՊՍԱՐԴԱՅԻՆ InAs ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏՈՒՄ

Ա.Ա. ՆԱՀԱՊԵՏՅԱՆ

Ուսումնասիրվել են չփոխազդող էլեկտրոնային գազի ջերմադինամիկական բնութագրերը ուժեղ սեղմված անհամաչափ էլիպսարդային InAs քվանտային կետում։ Բոլցմանյան մոտավորությամբ ստացվել են համակարգի էներգիական սպեկտրը և վիձակագրական գումարը։ Ներկայացվել են համակարգի միջին էներգիայի, էնտրոպիայի և ջերմունակության անալիտիկ արտահայտությունները։ Հետազոտվել են թվարկված ջերմադինամիկական բնութագրերի կախումները ջերմաստիձանից և քվանտային կետի երկրաչափական պարամետրերից։

NON-INTERACTING ELECTRON GAS THERMODYNAMICS IN THE STRONGLY OBLATE ASYMMETRIC ELLIPSOIDAL InAs QUANTUM DOT

A.A. NAHAPETYAN

The thermodynamic characteristics of a non-interacting electron gas in a strongly oblate asymmetric ellipsoidal quantum dot of InAs have been investigated. The analytical expressions for the energy spectrum and partition function of the system in the Boltzmann approximation are obtained. For given system analytical expressions for the average energy, entropy, and heat capacity of the system are presented. The dependences of the listed thermodynamic characteristics on the temperature and geometric parameters of the quantum dot have been studied.